

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения

Кафедра органической и аналитической и химии

УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой  
\_\_\_\_\_ Б.Н. Кузнецов  
«\_\_» \_\_\_\_\_ 2016г

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

**04.03.01 – Химия**

**ИЗУЧЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ НЕКОТОРЫХ  
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С УГЛЕРОДНЫМИ  
НАНОСТРУКТУРАМИ СОВРЕМЕННЫМИ  
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Руководитель \_\_\_\_\_ доцент, канд. физ.-мат. наук А.А. Кузубов

Выпускник \_\_\_\_\_ К.М. Николаева

Красноярск 2016

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа по теме «Изучение образования комплексов некоторых металлов с углеродными наноструктурами современными квантово-химическими методами» содержит 38 страниц текстового документа, 6 рисунков, 11 таблиц, ссылки на 33 литературных источника.

КАТАЛИЗ, БИГРАФЕН, ВАКАНСИЯ, ПЕРЕХОДНЫЕ МЕТАЛЛЫ, БИВАКАНСИЯ, МИГРАЦИЯ, ГРАФЕН

В связи с большой дороговизной и быстрым расходом платины, возрастает необходимость найти платине приемлемую замену. Потенциально ей может стать материал на графеновой основе с покрытием из наночастиц переходных металлов.

Данная работа посвящена изучению образования комплексов некоторых переходных металлов с углеродными наноструктурами современными квантово-химическими методами.

Объектами исследования являлись биграфен с моновакансией, биграфен с бивакансией и монослой графена. В работе была смоделирована структура биграфена с двумя типами вакансий. На место вакансий внедрены переходные металлы. Возможность образования таких комплексов определялось величиной барьера перехода металла с поверхности в межслоевое пространство через моновакансию и обратно. Также смоделирована бивакансия, так как в реальных системах наряду с моновакансией достаточно часто встречается бивакансия. Далее проведена оценка барьеров выхода атома металла из моно и бивакансии. На конечном этапе было проведено моделирование монослоя графена двух размеров суперячейки с целью оценить влияние второго слоя графена на стабилизацию положения металла. А также для оценки размерного эффекта и влияние концентрации вакансий на образование подобных комплексов.